ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1998, 17(7), 1324-1332, DOI:10.1021/om9709345

Compound 3

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 1. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Hf	3800(1)	8143(1)	1246(1)	35(1)
Cl	922(2)	8459(2)	1307(1)	74(1)
Cp(1)	3674(7)	9377(5)	561(2)	49(1)
Cp(2)	5315(6)	9015(5)	651(2)	51(2)
Cp(3)	5357(7)	7893(5)	570(2)	51(2)
Cp(4)	3710(7)	7548(5)	409(2)	49(2)
Cp(5)	2707(6)	8469(5)	405(2)	50(2)
Me(1)	3083(8)	10538(6)	589(2)	77(2)
Me(2)	6785(7)	9766(6)	737(2)	76(2)
Me(3)	6840(8)	7167(6)	591(2)	77(2)
Me(4)	3202(8)	6435(6)	216(2)	76(2)
Me(5)	916(7)	8497(6)	202(2)	69(2)
B	5716(8)	7633(6)	2005(2)	47(2)
C(1)	6449(6)	8478(4)	1731(2)	42(1)
C(2)	5434(7)	9426(5)	1722(2)	52(2)
C(3)	4098(7)	9227(6)	1956(2)	61(2)
C(4)	4143(6)	8133(6)	2116(2)	51(1)
N	6374(5)	6442(4)	2119(1)	49(1)
C(5)	7976(7)	6212(6)	1931(2)	65(2)
C(6)	9427(8)	6728(6)	2215(2)	84(2)
C(7)	8213(10)	4977(7)	1872(3)	112(3)
C(8)	6347(7)	6020(5)	2607(2)	63(2)
C(9)	6720(8)	6919(7)	2963(2)	83(2)
C(10)	4721(9)	5514(7)	2648(3)	102(2)
C(11)	3763(7)	6316(5)	1302(2)	47(1)
C(12)	3603(8)	5344(5)	1308(2)	64(2)
Si	3198(3)	3884(2)	1183(1)	79(1)
C(13)	1261(12)	3767(8)	774(3)	158(4)
C(14)	2962(12)	3106(7)	1715(3)	128(3)
C(15)	4966(12)	3354(7)	918(3)	140(4)

Table 4. Bond lengths [Å] and angles [°] for 1.

Hf-C(11)	2.237(6)
Hf-Cl	2.432(2)
Hf-C*	2.166
Hf-Cp*	2.214
Hf-Cp(1)	2.495(6)
Hf-Cp(2)	2.508(5)
Hf-Cp(3)	2.511(5)
Hf-Cp(4)	2.540(6)
Hf-Cp(5)	2.531(5)
Hf-C(1)	2.472(5)
Hf-C(2)	2.388(6)
Hf-C(3)	2.446(6)
Hf-C(4)	2.519(5)
Hf-B	2.620(7)
Cp(1)-Cp(2)	1.413(8)
Cp(1)-Cp(5)	1.405(8)
Cp(1)-Me(1)	1.504(9)
Cp(2)-Cp(3)	1.391(8)
Cp(2)-Me(2)	1.512(8)
Cp(3)-Cp(4)	1.439(8)
Cp(3)-Me(3)	1.504(9)
Cp(4)-Cp(5)	1.395(8)
Cp(4)-Me(4)	1.509(9)
Cp(5)-Me(5)	1.515(8)
Me(1)-HM1a	0.95
Me(1)-HM1b	0.95
Me(1)-HM1c	0.95
Me(2)-HM2a	0.95
Me(2)-HM2b	0.95
Me(2)-HM2c	0.95
Me(3)-HM3a	0.95
Me(3)-HM3b	0.95
Me(3)-HM3c	0.95
Me(4)-HM4a	0.95
Me(4)-HM4b	0.95
Me(4)-HM4c	0.94
Me(5)-HM5a	0.95
Me(5)-HM5b	0.95
Me(5)-HM5c	0.95
B-C(1)	1.482(8)
B-C(4)	1.506(9)
B-N	1.571(8)
C(1)-C(2)	1.426(7)
C(1)-H(1)	0.95
C(2)-C(3)	1.393(8)
C(2)-H(2)	0.95
C(3)-C(4)	1.413(8)
C(3)-H(3)	0.95
C(4)-H(4)	0.95
N-C(5)	1.522(8)
N-C(8)	1.522(7)
N-HN	0.95
C(5)-C(6)	1.500(9)
C(5)-C(7)	1.53(1)
C(5)-H(5)	0.95
C(6)-H(6a)	0.95
C(6)-H(6b)	0.95
C(6)-H(6c)	0.95
C(7)-H(7a)	0.95
C(7)-H(7b)	0.95
C(7)-H(7c)	0.95
C(8)-C(9)	1.514(9)
C(8)-C(10)	1.49(1)
C(8)-H(8)	0.95
C(9)-H(9a)	0.95
C(9)-H(9b)	0.95
C(9)-H(9c)	0.95
C(10)-H(10a)	0.95
C(10)-H(10b)	0.95
C(10)-H(10c)	0.95
C(11)-C(12)	1.196(8)
C(12)-Si	1.840(7)
Si-C(13)	1.87(1)
Si-C(14)	1.852(9)
Si-C(15)	1.86(1)
C(13)-H(13a)	0.95
C(13)-H(13b)	0.95
C(13)-H(13c)	0.95
C(14)-H(14a)	0.95
C(14)-H(14b)	0.95
C(14)-H(14c)	0.95
C(15)-H(15a)	0.95
C(15)-H(15b)	0.95
C(15)-H(15c)	0.95
Cl-Hf-C(11)	97.5(1)
Cp*-Hf-C*	133.7
Cp*-Hf-Cl	107.3
Cp*-Hf-C(11)	104.5
C*-Hf-Cl	106.9
C*-Hf-C(11)	100.9
Hf-B-N	123.4(4)
Hf-C(11)-C(12)	173.9(5)
Cp(5)-Cp(1)-Cp(2)	107.4(5)
Me(1)-Cp(1)-Cp(2)	126.3(5)
Me(1)-Cp(1)-Cp(5)	126.0(5)
Cp(3)-Cp(2)-Cp(1)	108.8(5)
Me(2)-Cp(2)-Cp(1)	124.5(5)
Me(2)-Cp(2)-Cp(3)	125.9(5)
Cp(4)-Cp(3)-Cp(2)	107.5(5)
Me(3)-Cp(3)-Cp(2)	127.8(5)
Me(3)-Cp(3)-Cp(4)	124.4(5)
Cp(5)-Cp(4)-Cp(3)	107.3(5)
Me(4)-Cp(4)-Cp(3)	126.1(5)
Me(4)-Cp(4)-Cp(5)	126.1(5)
Cp(4)-Cp(5)-Cp(1)	108.9(5)
Me(5)-Cp(5)-Cp(1)	126.1(5)
Me(5)-Cp(5)-Cp(4)	124.5(5)
HM1a-Me(1)-Cp(1)	108.3
HM1b-Me(1)-Cp(1)	108.5

HM1c-Me(1)-Cp(1)	108.4
HM1b-Me(1)-HM1a	110.6
HM1c-Me(1)-HM1a	110.3
HM1c-Me(1)-HM1b	110.6
HM2a-Me(2)-Cp(2)	108.4
HM2b-Me(2)-Cp(2)	108.4
HM2c-Me(2)-Cp(2)	108.4
HM2b-Me(2)-HM2a	110.5
HM2c-Me(2)-HM2a	110.5
HM2c-Me(2)-HM2b	110.5
HM3a-Me(3)-Cp(3)	108.4
HM3b-Me(3)-Cp(3)	108.3
HM3c-Me(3)-Cp(3)	108.4
HM3b-Me(3)-HM3a	110.6
HM3c-Me(3)-HM3a	110.6
HM3c-Me(3)-HM3b	110.4
HM4a-Me(4)-Cp(4)	108.4
HM4b-Me(4)-Cp(4)	108.4
HM4c-Me(4)-Cp(4)	108.6
HM4b-Me(4)-HM4a	110.1
HM4c-Me(4)-HM4a	110.5
HM4c-Me(4)-HM4b	110.8
HM5a-Me(5)-Cp(5)	108.4
HM5b-Me(5)-Cp(5)	108.4
HM5c-Me(5)-Cp(5)	108.4
HM5b-Me(5)-HM5a	110.6
HM5c-Me(5)-HM5a	110.5
HM5c-Me(5)-HM5b	110.5
C(4)-B-C(1)	104.9(5)
N-B-C(1)	127.1(5)
N-B-C(4)	127.8(5)
C(2)-C(1)-B	107.2(5)
H(1)-C(1)-B	126.4
H(1)-C(1)-C(2)	126.4
C(3)-C(2)-C(1)	110.3(5)
H(2)-C(2)-C(1)	124.8
H(2)-C(2)-C(3)	124.8
C(4)-C(3)-C(2)	109.8(5)
H(3)-C(3)-C(2)	125.1
H(3)-C(3)-C(4)	125.1
C(3)-C(4)-B	107.3(5)
H(4)-C(4)-B	126.3
H(4)-C(4)-C(3)	126.3
C(5)-N-B	112.7(4)
C(8)-N-B	117.6(4)
HN-N-B	102.2
C(8)-N-C(5)	113.5(4)
HN-N-C(5)	107.7
HN-N-C(8)	101.2
C(6)-C(5)-N	112.8(5)
C(7)-C(5)-N	110.6(5)
H(5)-C(5)-N	107.2
C(7)-C(5)-C(6)	111.8(6)
H(5)-C(5)-C(6)	105.8
H(5)-C(5)-C(7)	108.3
H(6a)-C(6)-C(5)	109.5
H(6b)-C(6)-C(5)	109.5
H(6c)-C(6)-C(5)	109.5
H(6b)-C(6)-H(6a)	109.5
H(6c)-C(6)-H(6a)	109.5
H(6c)-C(6)-H(6b)	109.5
H(7a)-C(7)-C(5)	109.5
H(7b)-C(7)-C(5)	109.5
H(7c)-C(7)-C(5)	109.5
H(7b)-C(7)-H(7a)	109.5
H(7c)-C(7)-H(7a)	109.5
H(7c)-C(7)-H(7b)	109.5
C(9)-C(8)-N	111.7(5)
C(10)-C(8)-N	109.9(5)
H(8)-C(8)-N	108.0
C(10)-C(8)-C(9)	110.4(5)
H(8)-C(8)-C(9)	107.4
H(8)-C(8)-C(10)	109.4
H(9a)-C(9)-C(8)	109.5
H(9b)-C(9)-C(8)	109.5
H(9c)-C(9)-C(8)	109.5
H(9b)-C(9)-H(9a)	109.5
H(9c)-C(9)-H(9a)	109.5
H(9c)-C(9)-H(9b)	109.5
H(10a)-C(10)-C(8)	109.5
H(10b)-C(10)-C(8)	109.5
H(10c)-C(10)-C(8)	109.5
H(10b)-C(10)-H(10a)	109.5
H(10c)-C(10)-H(10a)	109.5
H(10c)-C(10)-H(10b)	109.5
Si-C(12)-C(11)	167.6(6)
C(13)-Si-C(12)	108.5(4)
C(14)-Si-C(12)	111.6(4)
C(15)-Si-C(12)	106.8(4)
C(14)-Si-C(13)	108.7(4)
C(15)-Si-C(13)	110.9(4)
C(15)-Si-C(14)	110.3(4)
H(13a)-C(13)-Si	109.5
H(13b)-C(13)-Si	109.5
H(13c)-C(13)-Si	109.5
H(13b)-C(13)-H(13a)	109.5
H(13c)-C(13)-H(13a)	109.5
H(13c)-C(13)-H(13b)	109.5
H(14a)-C(14)-Si	109.5
H(14b)-C(14)-Si	109.5
H(14c)-C(14)-Si	109.5
H(14b)-C(14)-H(14a)	109.5
H(14c)-C(14)-H(14a)	109.5
H(14c)-C(14)-H(14b)	109.5
H(15a)-C(15)-Si	109.5
H(15b)-C(15)-Si	109.5
H(15c)-C(15)-Si	109.5
H(15b)-C(15)-H(15a)	109.5
H(15c)-C(15)-H(15a)	109.5
H(15c)-C(15)-H(15b)	109.5

Table 5. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 \times 10^3$) for 1. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Hf	30(1)	43(1)	33(1)	1(1)	2(1)	-1(1)
Cl	36(1)	129(2)	58(1)	2(1)	7(1)	7(1)
Cp(1)	53(3)	53(4)	41(3)	10(3)	5(3)	2(3)
Cp(2)	40(3)	68(4)	43(3)	12(3)	3(2)	-14(3)
Cp(3)	52(3)	63(4)	38(3)	9(3)	11(3)	6(3)
Cp(4)	55(4)	56(5)	37(4)	1(3)	8(3)	-7(3)
Cp(5)	41(3)	64(4)	44(3)	6(3)	2(3)	-2(3)
Me(1)	89(5)	62(4)	75(5)	11(4)	-6(4)	6(4)
Me(2)	65(4)	98(6)	64(4)	14(4)	4(3)	-30(4)
Me(3)	66(4)	107(6)	62(4)	1(4)	24(3)	19(4)
Me(4)	109(6)	76(5)	44(4)	-9(3)	16(4)	-18(4)
Me(5)	52(3)	96(6)	54(4)	7(4)	-8(3)	-3(3)
B	42(4)	56(4)	40(4)	-3(3)	-5(3)	2(3)
C(1)	42(3)	47(4)	36(3)	2(2)	3(2)	0(2)
C(2)	60(4)	45(4)	47(3)	2(3)	-7(3)	-5(3)
C(3)	63(4)	59(5)	57(4)	-14(3)	-4(3)	19(4)
C(4)	45(3)	72(5)	34(3)	-10(4)	3(2)	0(4)
N	52(3)	48(3)	44(3)	6(2)	-3(2)	1(2)
C(5)	63(4)	74(5)	60(4)	12(4)	9(3)	19(4)
C(6)	63(4)	103(6)	87(5)	33(5)	6(4)	5(4)
C(7)	125(7)	86(6)	120(7)	-18(5)	-1(5)	50(5)
C(8)	74(4)	67(5)	48(4)	21(3)	2(3)	-5(3)
C(9)	102(5)	103(6)	41(3)	12(4)	0(3)	12(5)
C(10)	94(5)	117(7)	95(6)	49(5)	12(4)	-31(5)
C(11)	62(3)	41(3)	36(3)	3(3)	-7(3)	-9(4)
C(12)	76(4)	68(5)	47(4)	1(4)	-3(3)	-13(4)
Si	112(2)	55(1)	69(1)	-4(1)	12(1)	-24(1)
C(13)	192(10)	126(8)	136(8)	-24(7)	-56(7)	-62(8)
C(14)	198(10)	77(6)	116(7)	10(6)	44(6)	-40(6)
C(15)	194(10)	93(8)	149(9)	-41(6)	78(7)	-36(7)

Table 6. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for1.

	x	y	z	U(eq)
HM1a	3860	11010	480	92
HM1b	2980	10700	900	92
HM1c	2050	10600	400	92
HM2a	6950	10090	450	91
HM2b	7710	9340	860	91
HM2c	6570	10310	950	91
HM3a	7160	6960	900	92
HM3b	7690	7570	480	92
HM3c	6550	6540	410	92
HM4a	3880	6250	-10	91
HM4b	2090	6470	80	91
HM4c	3340	5920	460	91
HM5a	410	7850	290	82
HM5b	850	8540	-120	82
HM5c	430	9120	320	82
H(1)	7410	8400	1590	50
H(2)	5640	10100	1580	63
H(3)	3280	9750	2000	73
H(4)	3330	7780	2270	61
HN	5550	6000	1950	59
H(5)	7900	6550	1630	78
H(6a)	10390	6560	2080	101
H(6b)	9280	7500	2220	101
H(6c)	9520	6450	2520	101
H(7a)	9220	4850	1750	134
H(7b)	8230	4620	2160	134
H(7c)	7330	4690	1660	134
H(9a)	6690	6630	3260	100
H(9b)	7780	7210	2940	100
H(9c)	5920	7480	2910	100
H(10a)	4710	5250	2950	122
H(10b)	3880	6050	2580	122
H(10c)	4530	4920	2440	122
H(8)	7180	5480	2670	76
H(13a)	1040	3020	710	190
H(13b)	380	4080	910	190
H(13c)	1380	4150	500	190
H(14a)	2750	2360	1640	154
H(14b)	3940	3160	1930	154
H(14c)	2070	3400	1850	154
H(15a)	4800	2600	850	168
H(15b)	5060	3750	640	168
H(15c)	5940	3440	1130	168

Compound 5b

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 2. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Hf	7434(1)	353(1)	8622(1)	36(1)
Cl	6580(3)	-362(1)	6337(2)	67(1)
B	5968(9)	1681(5)	7494(9)	41(2)
P	5793(3)	-829(2)	9882(3)	65(1)
C(1)	9713(9)	-598(5)	8700(11)	57(2)
C(2)	9661(10)	-366(6)	10139(10)	64(2)
C(3)	9902(10)	482(8)	10264(10)	65(3)
C(4)	10170(10)	780(5)	8858(14)	68(3)
C(5)	10049(9)	115(4)	7884(11)	54(2)
C(6)	9682(12)	-1468(5)	8057(13)	94(4)
C(7)	9701(16)	-943(9)	11435(15)	131(5)
C(8)	10212(16)	962(9)	11666(14)	137(6)
C(9)	10818(11)	1589(5)	8534(14)	95(4)
C(10)	10398(10)	118(6)	6290(10)	83(3)
C(21)	4956(9)	1075(5)	8205(10)	57(2)
C(22)	5352(14)	1036(7)	9704(13)	81(3)
C(23)	6700(15)	1434(6)	10099(10)	86(4)
C(24)	7213(8)	1808(4)	8772(8)	53(2)
C(51)	3797(11)	-824(7)	9158(17)	128(5)
C(52)	5652(18)	-846(8)	11814(13)	144(6)
C(53)	6218(11)	-1898(6)	9452(13)	91(3)
N(A)	6003(25)	2056(14)	6005(27)	48(5)
C(31A)	7326(24)	2512(9)	5692(21)	60(5)
C(32A)	8004(68)	2000(39)	4599(61)	147(25)
C(33A)	7033(56)	3399(23)	5415(41)	82(12)
C(41A)	4741(24)	2025(13)	4845(19)	75(6)
C(42A)	4439(49)	1146(24)	4194(32)	112(12)
C(43A)	3333(37)	2340(31)	5282(53)	74(8)
N(B)	5510(44)	1854(23)	6007(56)	47(10)
C(31B)	6403(38)	2340(18)	5075(37)	59(9)
C(32B)	8068(102)	2172(61)	4636(79)	99(25)
C(33B)	6703(103)	3217(43)	5446(75)	115(31)
C(41B)	4126(38)	1603(23)	5164(32)	65(10)
C(42B)	4324(99)	1046(43)	3689(65)	120(23)
C(43B)	2886(85)	2267(58)	4869(103)	93(26)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 2.

Hf-C(23)	2.349(9)
Hf-C(24)	2.383(7)
Hf-Cl	2.425(2)
Hf-C(22)	2.453(9)
Hf-C(21)	2.487(8)
Hf-C(4)	2.513(9)
Hf-C(5)	2.516(8)
Hf-C(3)	2.518(8)
Hf-C(1)	2.543(8)
Hf-C(2)	2.563(8)
Hf-B	2.669(7)
Hf-P	2.740(3)
B-N(B)	1.39(5)
B-N(A)	1.49(2)
B-C(21)	1.525(11)
B-C(24)	1.525(10)
P-C(52)	1.771(11)
P-C(51)	1.820(10)
P-C(53)	1.833(10)
C(1)-C(2)	1.365(12)
C(1)-C(5)	1.426(12)
C(1)-C(6)	1.531(11)
C(2)-C(3)	1.400(14)
C(2)-C(7)	1.504(14)
C(3)-C(4)	1.410(14)
C(3)-C(8)	1.493(14)
C(4)-C(5)	1.395(11)
C(4)-C(9)	1.480(12)
C(5)-C(10)	1.512(12)
C(21)-C(22)	1.368(13)
C(22)-C(23)	1.37(2)
C(23)-C(24)	1.466(13)
N(A)-C(31A)	1.44(2)
N(A)-C(41A)	1.45(3)
C(31A)-C(33A)	1.49(4)
C(31A)-C(32A)	1.47(5)
C(41A)-C(43A)	1.45(5)
C(41A)-C(42A)	1.56(4)
N(B)-C(41B)	1.43(5)
N(B)-C(31B)	1.46(4)
C(31B)-C(33B)	1.48(8)
C(31B)-C(32B)	1.60(9)
C(41B)-C(43B)	1.55(9)
C(41B)-C(42B)	1.64(6)
C(23)-Hf-C(24)	36.1(3)
C(23)-Hf-Cl	140.1(3)
C(24)-Hf-Cl	120.4(2)
C(23)-Hf-C(22)	33.2(4)
C(24)-Hf-C(22)	57.0(3)
Cl-Hf-C(22)	112.4(4)
C(23)-Hf-C(21)	55.6(3)
C(24)-Hf-C(21)	57.4(3)
Cl-Hf-C(21)	84.8(2)
C(22)-Hf-C(21)	32.1(3)
C(23)-Hf-C(4)	94.0(4)
C(24)-Hf-C(4)	78.7(3)
Cl-Hf-C(4)	114.5(3)
C(22)-Hf-C(4)	127.2(4)
C(21)-Hf-C(4)	135.4(3)
C(23)-Hf-C(5)	126.1(4)
C(24)-Hf-C(5)	104.7(2)
Cl-Hf-C(5)	84.8(2)
C(22)-Hf-C(5)	159.1(4)
C(21)-Hf-C(5)	149.3(3)
C(4)-Hf-C(5)	32.2(2)
C(23)-Hf-C(3)	83.0(4)
C(24)-Hf-C(3)	87.4(3)
Cl-Hf-C(3)	135.7(2)
C(22)-Hf-C(3)	111.7(4)
C(21)-Hf-C(3)	138.4(3)
C(4)-Hf-C(3)	32.6(3)
C(5)-Hf-C(3)	53.3(3)
C(23)-Hf-C(1)	135.3(3)
C(24)-Hf-C(1)	132.4(3)
Cl-Hf-C(1)	84.5(2)
C(22)-Hf-C(1)	153.8(3)
C(21)-Hf-C(1)	168.6(3)
C(4)-Hf-C(1)	53.7(3)
C(5)-Hf-C(1)	32.7(3)
C(3)-Hf-C(1)	52.9(3)
C(23)-Hf-C(2)	106.4(3)
C(24)-Hf-C(2)	119.2(3)
Cl-Hf-C(2)	112.9(2)
C(22)-Hf-C(2)	124.2(4)
C(21)-Hf-C(2)	156.1(3)
C(4)-Hf-C(2)	53.2(3)
C(5)-Hf-C(2)	52.6(3)
C(3)-Hf-C(2)	32.0(3)
C(1)-Hf-C(2)	31.0(3)
C(23)-Hf-B	57.1(3)
C(24)-Hf-B	34.5(2)
Cl-Hf-B	88.2(2)
C(22)-Hf-B	55.2(3)
C(21)-Hf-B	34.2(2)
C(4)-Hf-B	103.5(3)
C(5)-Hf-B	116.6(3)
C(3)-Hf-B	121.0(3)
C(1)-Hf-B	149.0(3)
C(2)-Hf-B	152.9(3)
C(23)-Hf-P	95.5(3)
C(24)-Hf-P	128.6(2)
Cl-Hf-P	83.60(9)
C(22)-Hf-P	72.1(3)
C(21)-Hf-P	83.9(2)
C(4)-Hf-P	135.4(3)
C(5)-Hf-P	123.4(2)
C(3)-Hf-P	106.2(3)
C(1)-Hf-P	91.0(2)
C(2)-Hf-P	82.4(2)
B-Hf-P	118.1(2)

N(B)-B-C(21)	114.7(14)	C(9)-C(4)-Hf	128.5(7)
N(A)-B-C(21)	136.3(11)	C(4)-C(5)-C(1)	108.1(8)
N(B)-B-C(24)	144.9(14)	C(4)-C(5)-C(10)	126.4(8)
N(A)-B-C(24)	123.3(10)	C(1)-C(5)-C(10)	125.2(7)
C(21)-B-C(24)	100.2(6)	C(4)-C(5)-Hf	73.8(5)
N(B)-B-Hf	128(2)	C(1)-C(5)-Hf	74.7(5)
N(A)-B-Hf	128.5(10)	C(10)-C(5)-Hf	123.1(6)
C(21)-B-Hf	66.3(4)	C(22)-C(21)-B	110.6(8)
C(24)-B-Hf	62.4(4)	C(22)-C(21)-Hf	72.6(5)
C(52)-P-C(51)	100.6(7)	B-C(21)-Hf	79.5(4)
C(52)-P-C(53)	103.5(6)	C(21)-C(22)-C(23)	111.0(9)
C(51)-P-C(53)	98.1(6)	C(21)-C(22)-Hf	75.3(5)
C(52)-P-Hf	121.6(5)	C(23)-C(22)-Hf	69.2(6)
C(51)-P-Hf	112.8(4)	C(22)-C(23)-C(24)	108.8(8)
C(53)-P-Hf	116.6(4)	C(22)-C(23)-Hf	77.6(6)
C(2)-C(1)-C(5)	107.6(8)	C(24)-C(23)-Hf	73.2(5)
C(2)-C(1)-C(6)	128.3(9)	C(23)-C(24)-B	107.7(8)
C(5)-C(1)-C(6)	123.5(9)	C(23)-C(24)-Hf	70.7(4)
C(2)-C(1)-Hf	75.3(5)	B-C(24)-Hf	83.1(4)
C(5)-C(1)-Hf	72.6(4)	C(31A)-N(A)-C(41A)	117(2)
C(6)-C(1)-Hf	124.9(6)	C(31A)-N(A)-B	119(2)
C(1)-C(2)-C(3)	109.3(9)	C(41A)-N(A)-B	124(2)
C(1)-C(2)-C(7)	125.1(10)	N(A)-C(31A)-C(33A)	114(2)
C(3)-C(2)-C(7)	124.3(11)	N(A)-C(31A)-C(32A)	104(3)
C(1)-C(2)-Hf	73.7(5)	C(33A)-C(31A)-C(32A)	121(3)
C(3)-C(2)-Hf	72.2(5)	N(A)-C(41A)-C(43A)	114(2)
C(7)-C(2)-Hf	131.0(8)	N(A)-C(41A)-C(42A)	113(2)
C(2)-C(3)-C(4)	107.8(9)	C(43A)-C(41A)-C(42A)	108(3)
C(2)-C(3)-C(8)	126.8(11)	B-N(B)-C(41B)	127(2)
C(4)-C(3)-C(8)	123.8(11)	B-N(B)-C(31B)	124(3)
C(2)-C(3)-Hf	75.8(5)	C(41B)-N(B)-C(31B)	110(4)
C(4)-C(3)-Hf	73.5(5)	N(B)-C(31B)-C(33B)	119(4)
C(8)-C(3)-Hf	127.9(8)	N(B)-C(31B)-C(32B)	129(4)
C(5)-C(4)-C(3)	107.2(8)	C(33B)-C(31B)-C(32B)	94(5)
C(5)-C(4)-C(9)	124.8(10)	N(B)-C(41B)-C(43B)	116(4)
C(3)-C(4)-C(9)	126.5(10)	N(B)-C(41B)-C(42B)	116(4)
C(5)-C(4)-Hf	74.0(5)	C(43B)-C(41B)-C(42B)	113(5)
C(3)-C(4)-Hf	73.9(5)		

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2 \times 10^3$) for 2. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Hf	34(1)	32(1)	41(1)	0(1)	4(1)	5(1)
Cl	69(1)	64(1)	64(1)	-19(1)	-12(1)	1(1)
B	42(5)	37(4)	44(5)	7(3)	5(4)	7(3)
P	56(2)	56(1)	87(2)	27(1)	19(1)	5(1)
C(1)	34(5)	41(4)	95(7)	-10(4)	2(4)	10(4)
C(2)	50(5)	64(6)	72(6)	9(5)	-14(5)	6(4)
C(3)	51(4)	60(9)	77(5)	-20(6)	-18(4)	3(5)
C(4)	41(5)	37(5)	125(10)	-20(6)	6(6)	-5(4)
C(5)	39(4)	36(5)	89(6)	-3(3)	9(4)	6(3)
C(6)	73(7)	43(5)	163(10)	-38(6)	2(7)	13(5)
C(7)	104(10)	158(13)	119(10)	61(10)	-42(8)	30(9)
C(8)	118(11)	161(13)	117(10)	-67(10)	-45(9)	3(10)
C(9)	52(6)	51(5)	185(12)	-10(6)	27(7)	-6(5)
C(10)	60(5)	90(9)	106(7)	-13(5)	38(5)	6(5)
C(21)	42(4)	51(4)	81(6)	7(4)	12(4)	7(4)
C(22)	99(9)	66(6)	89(8)	35(6)	52(7)	44(6)
C(23)	124(10)	86(7)	41(5)	-10(4)	-25(6)	77(8)
C(24)	44(5)	40(4)	70(5)	-4(3)	-8(4)	15(3)
C(51)	52(6)	105(9)	230(16)	62(10)	24(8)	-14(6)
C(52)	212(17)	121(10)	111(10)	65(8)	72(11)	26(11)
C(53)	70(7)	59(6)	142(9)	22(6)	1(7)	-11(5)
N(A)	45(13)	63(12)	37(8)	28(8)	7(9)	-7(8)
C(31A)	58(11)	69(9)	55(9)	21(8)	16(9)	6(8)
C(32A)	127(42)	158(38)	163(37)	-47(25)	49(27)	70(32)
C(33A)	62(20)	92(20)	90(24)	-31(19)	-4(16)	7(16)
C(41A)	89(14)	77(11)	55(10)	17(8)	-18(9)	-23(11)
C(42A)	134(21)	143(26)	51(16)	-36(15)	-29(15)	38(18)
C(43A)	48(18)	79(15)	88(20)	26(13)	-26(13)	1(13)
N(B)	47(23)	45(16)	53(17)	21(12)	33(18)	-7(12)
C(31B)	46(18)	63(17)	63(19)	-1(15)	-18(16)	14(13)
C(32B)	95(50)	120(42)	80(37)	9(31)	0(35)	2(35)
C(33B)	86(47)	145(56)	116(43)	108(43)	26(34)	36(38)
C(41B)	63(20)	75(21)	52(16)	16(15)	-19(14)	15(16)
C(42B)	199(60)	81(24)	87(43)	-29(30)	44(43)	-26(31)
C(43B)	63(44)	100(40)	113(65)	54(42)	-8(36)	-6(33)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 2.

	x	y	z	U(eq)
H(6A)	9735(12)	-1440(5)	7007(13)	80
H(6B)	8760(12)	-1737(5)	8244(13)	80
H(6C)	10534(12)	-1772(5)	8518(13)	80
H(7A)	9654(16)	-642(9)	12338(15)	80
H(7B)	10613(16)	-1264(9)	11512(15)	80
H(7C)	8838(16)	-1301(9)	11272(15)	80
H(8A)	9947(16)	643(9)	12488(14)	80
H(8B)	9609(16)	1452(9)	11577(14)	80
H(8C)	11266(16)	1107(9)	11828(14)	80
H(9A)	10884(11)	1652(5)	7491(14)	80
H(9B)	11814(11)	1628(5)	9064(14)	80
H(9C)	10185(11)	2014(5)	8866(14)	80
H(10A)	10224(10)	-419(6)	5872(10)	80
H(10B)	11436(10)	271(6)	6246(10)	80
H(10C)	9746(10)	506(6)	5736(10)	80
H(21)	4178(9)	773(5)	7690(10)	80
H(22)	4784(14)	772(7)	10365(13)	80
H(23)	7202(15)	1463(6)	11053(10)	80
H(24)	8131(8)	2076(4)	8721(8)	80
H(51A)	3700(11)	-814(7)	8093(17)	80
H(51B)	3311(11)	-350(7)	9517(17)	80
H(51C)	3327(11)	-1312(7)	9486(17)	80
H(52A)	6652(18)	-848(8)	12339(13)	80
H(52B)	5114(18)	-1327(8)	12074(13)	80
H(52C)	5119(18)	-365(8)	12078(13)	80
H(53A)	6313(11)	-1951(6)	8412(13)	80
H(53B)	5417(11)	-2248(6)	9709(13)	80
H(53C)	7153(11)	-2054(6)	10014(13)	80
H(31A)	8032(24)	2485(9)	6601(21)	71
H(32A)	8111(68)	1447(39)	4960(61)	220
H(32B)	8983(68)	2214(39)	4448(61)	220
H(32C)	7361(68)	2005(39)	3676(61)	220
H(33A)	6596(56)	3633(23)	6241(41)	123
H(33B)	6344(56)	3464(23)	4530(41)	123
H(33C)	7970(56)	3672(23)	5295(41)	123
H(41A)	5011(24)	2372(13)	4033(19)	91
H(42A)	5353(49)	935(24)	3862(32)	168
H(42B)	3660(49)	1172(24)	3372(32)	168
H(42C)	4120(49)	793(24)	4946(32)	168
H(43A)	3501(37)	2877(31)	5707(53)	111
H(43B)	2970(37)	1979(31)	6001(53)	111
H(43C)	2594(37)	2375(31)	4428(53)	111
H(31B)	5773(38)	2360(18)	4118(37)	71
H(32D)	8137(102)	1616(61)	4304(79)	149
H(32E)	8795(102)	2261(61)	5485(79)	149
H(32F)	8272(102)	2539(61)	3854(79)	149
H(33D)	5799(103)	3465(43)	5734(75)	172
H(33E)	7003(103)	3497(43)	4594(75)	172
H(33F)	7499(103)	3256(43)	6249(75)	172
H(41B)	3686(38)	1217(23)	5827(32)	79
H(42D)	5034(99)	611(43)	3950(65)	180
H(42E)	4692(99)	1385(43)	2941(65)	180
H(42F)	3362(99)	816(43)	3314(65)	180
H(43D)	2892(85)	2615(58)	5724(103)	140

H(43E)	1913(85)	2009(58)	4672(103)	140
H(43F)	3085(85)	2591(58)	4027(103)	140

Compound 6

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 3. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Hf	2202(1)	5528(1)	3942(1)	17(1)
Cl	3571(2)	4618(2)	3134(2)	32(1)
C(1)	3127(7)	4676(8)	5192(7)	27(3)
C(2)	1998(7)	4797(7)	5430(6)	26(3)
C(3)	1784(8)	5834(8)	5481(7)	28(3)
C(4)	2780(9)	6336(7)	5309(6)	25(3)
C(5)	3593(7)	5623(9)	5116(6)	27(2)
C(6)	3759(9)	3740(8)	5153(7)	37(3)
C(7)	1227(8)	4057(8)	5780(7)	38(3)
C(8)	732(8)	6253(9)	5831(7)	41(3)
C(9)	2966(9)	7391(8)	5477(7)	36(3)
C(10)	4782(8)	5835(9)	4934(7)	40(3)
B	637(9)	6330(8)	3065(7)	22(3)
C(11)	1629(8)	6176(8)	2506(7)	28(2)
C(12)	2510(6)	6735(7)	2819(6)	24(2)
C(13)	2185(8)	7220(7)	3577(6)	27(2)
C(14)	1082(7)	6995(7)	3755(6)	26(2)
C(15)	-578(8)	6016(7)	2892(7)	29(2)
C(16)	-1494(8)	5781(7)	2706(7)	32(3)
Si	-2881(2)	5399(2)	2369(2)	37(1)
C(17)	-3286(8)	4273(10)	2962(10)	61(4)
C(18)	-3888(8)	6405(10)	2571(8)	49(3)
C(19)	-2801(9)	5137(9)	1202(8)	57(3)
P	897(2)	3977(2)	3507(2)	28(1)
C(20)	1524(9)	2812(8)	3751(9)	50(3)
C(21)	725(9)	3880(8)	2364(8)	40(3)
C(22)	-489(7)	3787(7)	3886(9)	38(2)

Table 4. Bond lengths [Å] and angles [°] for 3.

Hf-Cl	2.434(2)
Hf-P	2.732(3)
Hf-CpA	2.214
Hf-CpB	2.147
C(1)-C(2)	1.43(1)
C(1)-C(5)	1.42(1)
C(1)-C(6)	1.49(2)
C(2)-C(3)	1.44(1)
C(2)-C(7)	1.48(1)
C(3)-C(4)	1.42(1)
C(3)-C(8)	1.51(2)
C(4)-C(5)	1.42(1)
C(4)-C(9)	1.48(1)
C(5)-C(10)	1.50(2)
B-C(11)	1.51(2)
B-C(14)	1.51(1)
B-C(15)	1.56(2)
C(11)-C(12)	1.41(1)
C(12)-C(13)	1.42(1)
C(13)-C(14)	1.40(1)
C(15)-C(16)	1.20(1)
C(16)-Si	1.84(1)
Si-C(17)	1.86(1)
Si-C(18)	1.87(1)
Si-C(19)	1.87(1)
P-C(20)	1.80(1)
P-C(21)	1.81(1)
P-C(22)	1.81(1)
Hf-Cl	2.434(2)
Hf-P	2.732(3)
Hf-CpA	2.214
Hf-CpB	2.147
Hf-C(1)	2.54(1)
Hf-C(2)	2.552(9)
Hf-C(3)	2.50(1)
Hf-C(4)	2.51(1)
Hf-C(5)	2.51(1)
Hf-B	2.59(1)
Hf-C(11)	2.52(1)
Hf-C(12)	2.441(9)
Hf-C(13)	2.379(9)
Hf-C(14)	2.441(9)
C(1)-C(2)	1.43(1)
C(1)-C(5)	1.42(1)
C(1)-C(6)	1.49(2)
C(2)-C(3)	1.44(1)
C(2)-C(7)	1.48(1)
C(3)-C(4)	1.42(1)
C(3)-C(8)	1.51(2)
C(4)-C(5)	1.42(1)
C(4)-C(9)	1.48(1)
C(5)-C(10)	1.50(2)
C(6)-H(6a)	0.95
C(6)-H(6b)	0.95
C(6)-H(6c)	0.95
C(7)-H(7a)	0.95
C(7)-H(7b)	0.95
C(7)-H(7c)	0.95
C(8)-H(8a)	0.95
C(8)-H(8b)	0.95
C(8)-H(8c)	0.95
C(9)-H(9a)	0.95
C(9)-H(9b)	0.95
C(9)-H(9c)	0.95
C(10)-H(10a)	0.95
C(10)-H(10b)	0.95
C(10)-H(10c)	0.95
B-C(11)	1.51(2)
B-C(14)	1.51(1)
B-C(15)	1.56(2)
C(11)-C(12)	1.41(1)
C(11)-H(11)	0.95
C(12)-C(13)	1.42(1)
C(12)-H(12)	0.95
C(13)-C(14)	1.40(1)
C(13)-H(13)	0.95
C(14)-H(14)	0.95
C(15)-C(16)	1.20(1)
C(16)-Si	1.84(1)
Si-C(17)	1.86(1)
Si-C(18)	1.87(1)
Si-C(19)	1.87(1)
C(17)-H(17a)	0.95
C(17)-H(17b)	0.95
C(17)-H(17c)	0.95
C(18)-H(18a)	0.95
C(18)-H(18b)	0.95
C(18)-H(18c)	0.95
C(19)-H(19a)	0.95
C(19)-H(19b)	0.95
C(19)-H(19c)	0.95
P-C(20)	1.80(1)
P-C(21)	1.81(1)
P-C(22)	1.81(1)
C(20)-H(20a)	0.95
C(20)-H(20b)	0.95
C(20)-H(20c)	0.95
C(21)-H(21a)	0.95
C(21)-H(21b)	0.95
C(21)-H(21c)	0.95
C(22)-H(22a)	0.95
C(22)-H(22b)	0.95
C(22)-H(22c)	0.95
CpA-Hf-CpB	133.0
CpA-Hf-Cl	108.0
CpA-Hf-P	110.6
CpB-Hf-Cl	107.7
CpB-Hf-P	103.4
Cl-Hf-P	82.66(8)

C(5)-C(1)-C(2)	107.4(8)
C(6)-C(1)-C(2)	127.1(9)
C(6)-C(1)-C(5)	124.9(9)
C(3)-C(2)-C(1)	107.5(8)
C(7)-C(2)-C(1)	128.6(9)
C(7)-C(2)-C(3)	122.3(9)
C(4)-C(3)-C(2)	108.0(9)
C(8)-C(3)-C(2)	123.2(9)
C(8)-C(3)-C(4)	127.8(9)
C(5)-C(4)-C(3)	107.8(9)
C(9)-C(4)-C(3)	124.5(9)
C(9)-C(4)-C(5)	126.7(9)
C(4)-C(5)-C(1)	109.2(8)
C(10)-C(5)-C(1)	125.2(9)
C(10)-C(5)-C(4)	125.4(9)
C(14)-B-C(11)	102.4(8)
C(15)-B-C(11)	128.1(9)
C(15)-B-C(14)	128.9(9)
C(12)-C(11)-B	109.3(9)
C(13)-C(12)-C(11)	109.5(8)
C(14)-C(13)-C(12)	109.4(8)
C(13)-C(14)-B	109.3(8)
C(16)-C(15)-B	176(1)
Si-C(16)-C(15)	177.3(9)
C(17)-Si-C(16)	109.4(5)
C(18)-Si-C(16)	110.1(5)
C(19)-Si-C(16)	106.7(5)
C(18)-Si-C(17)	110.4(6)
C(19)-Si-C(17)	110.2(6)
C(19)-Si-C(18)	110.0(5)
C(21)-P-C(20)	101.2(5)
C(22)-P-C(20)	101.4(5)
C(22)-P-C(21)	102.0(5)
CpA-Hf-CpB	133.0
CpA-Hf-Cl	108.0
CpA-Hf-P	110.6
CpB-Hf-Cl	107.7
CpB-Hf-P	103.4
Cl-Hf-P	82.66(8)
C(5)-C(1)-C(2)	107.4(8)
C(6)-C(1)-C(2)	127.1(9)
C(6)-C(1)-C(5)	124.9(9)
C(3)-C(2)-C(1)	107.5(8)
C(7)-C(2)-C(1)	128.6(9)
C(7)-C(2)-C(3)	122.3(9)
C(4)-C(3)-C(2)	108.0(9)
C(8)-C(3)-C(2)	123.2(9)
C(8)-C(3)-C(4)	127.8(9)
C(5)-C(4)-C(3)	107.8(9)
C(9)-C(4)-C(3)	124.5(9)
C(9)-C(4)-C(5)	126.7(9)
C(4)-C(5)-C(1)	109.2(8)
C(10)-C(5)-C(1)	125.2(9)
C(10)-C(5)-C(4)	125.4(9)
H(6a)-C(6)-C(1)	109.5
H(6b)-C(6)-C(1)	109.5
H(6c)-C(6)-C(1)	109.5
H(6b)-C(6)-H(6a)	109.5
H(6c)-C(6)-H(6a)	109.5
H(6c)-C(6)-H(6b)	109.5
H(7a)-C(7)-C(2)	109.5
H(7b)-C(7)-C(2)	109.5
H(7c)-C(7)-C(2)	109.5
H(7b)-C(7)-H(7a)	109.5
H(7c)-C(7)-H(7a)	109.5
H(7c)-C(7)-H(7b)	109.5
H(8a)-C(8)-C(3)	109.5
H(8b)-C(8)-C(3)	109.5
H(8c)-C(8)-C(3)	109.5
H(8b)-C(8)-H(8a)	109.5
H(8c)-C(8)-H(8a)	109.5
H(8c)-C(8)-H(8b)	109.5
H(9a)-C(9)-C(4)	109.5
H(9b)-C(9)-C(4)	109.5
H(9c)-C(9)-C(4)	109.5
H(9b)-C(9)-H(9a)	109.5
H(9c)-C(9)-H(9a)	109.5
H(9c)-C(9)-H(9b)	109.5
H(10a)-C(10)-C(5)	109.5
H(10b)-C(10)-C(5)	109.5
H(10c)-C(10)-C(5)	109.5
H(10b)-C(10)-H(10a)	109.5
H(10c)-C(10)-H(10a)	109.5
H(10c)-C(10)-H(10b)	109.5
C(14)-B-C(11)	102.4(8)
C(15)-B-C(11)	128.1(9)
C(15)-B-C(14)	128.9(9)
C(12)-C(11)-B	109.3(9)
H(11)-C(11)-B	125.3
H(11)-C(11)-C(12)	125.3
C(13)-C(12)-C(11)	109.5(8)
H(12)-C(12)-C(11)	125.2
H(12)-C(12)-C(13)	125.2
C(14)-C(13)-C(12)	109.4(8)
H(13)-C(13)-C(12)	125.3
H(13)-C(13)-C(14)	125.3
C(13)-C(14)-B	109.3(8)
H(14)-C(14)-B	125.4
H(14)-C(14)-C(13)	125.4
C(16)-C(15)-B	176(1)
Si-C(16)-C(15)	177.3(9)
C(17)-Si-C(16)	109.4(5)
C(18)-Si-C(16)	110.1(5)
C(19)-Si-C(16)	106.7(5)
C(18)-Si-C(17)	110.4(6)
C(19)-Si-C(17)	110.2(6)
C(19)-Si-C(18)	110.0(5)
H(17a)-C(17)-Si	109.5
H(17b)-C(17)-Si	109.5
H(17c)-C(17)-Si	109.5
H(17b)-C(17)-H(17a)	109.5
H(17c)-C(17)-H(17a)	109.5
H(17c)-C(17)-H(17b)	109.5
H(18a)-C(18)-Si	109.5
H(18b)-C(18)-Si	109.5
H(18c)-C(18)-Si	109.5
H(18b)-C(18)-H(18a)	109.5
H(18c)-C(18)-H(18a)	109.5
H(18c)-C(18)-H(18b)	109.5
H(19a)-C(19)-Si	109.5
H(19b)-C(19)-Si	109.5
H(19c)-C(19)-Si	109.5
H(19b)-C(19)-H(19a)	109.5
H(19c)-C(19)-H(19a)	109.5
H(19c)-C(19)-H(19b)	109.5
C(21)-P-C(20)	101.2(5)

C(22)-P-C(20)	101.4(5)	H(21c)-C(21)-P	109.5
C(22)-P-C(21)	102.0(5)	H(21b)-C(21)-H(21a)	109.5
H(20a)-C(20)-P	109.5	H(21c)-C(21)-H(21a)	109.5
H(20b)-C(20)-P	109.5	H(21c)-C(21)-H(21b)	109.5
H(20c)-C(20)-P	109.5	H(22a)-C(22)-P	109.5
H(20b)-C(20)-H(20a)	109.5	H(22b)-C(22)-P	109.5
H(20c)-C(20)-H(20a)	109.5	H(22c)-C(22)-P	109.5
H(20c)-C(20)-H(20b)	109.5	H(22b)-C(22)-H(22a)	109.5
H(21a)-C(21)-P	109.5	H(22c)-C(22)-H(22a)	109.5
H(21b)-C(21)-P	109.5	H(22c)-C(22)-H(22b)	109.5

Table 5. Anisotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 3. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + ... + 2 h k a^* b^* U12]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Hf	20(1)	18(1)	14(1)	-1(1)	-1(1)	0(1)
Cl	31(1)	41(2)	25(1)	-6(1)	6(1)	7(1)
C(1)	36(6)	26(7)	19(5)	-3(5)	-7(4)	6(4)
C(2)	33(6)	36(6)	9(5)	11(4)	-6(4)	2(4)
C(3)	28(5)	37(7)	18(6)	-3(5)	-1(4)	5(4)
C(4)	34(5)	31(6)	10(5)	4(4)	-14(5)	-7(6)
C(5)	22(4)	41(7)	18(5)	-9(6)	-3(4)	7(5)
C(6)	47(6)	35(7)	28(7)	3(6)	-6(5)	7(5)
C(7)	41(6)	44(7)	27(7)	11(5)	0(5)	-6(5)
C(8)	45(6)	51(8)	26(7)	-2(5)	6(5)	15(5)
C(9)	51(7)	32(6)	25(6)	-7(5)	-7(5)	1(5)
C(10)	33(5)	52(8)	35(7)	-5(6)	-4(5)	-4(5)
B	36(6)	10(5)	21(6)	1(5)	0(5)	0(4)
C(11)	31(5)	29(6)	23(6)	5(5)	-6(5)	-5(5)
C(12)	25(6)	30(6)	18(5)	5(5)	2(4)	-8(4)
C(13)	33(4)	25(5)	23(5)	-9(4)	-9(5)	2(5)
C(14)	34(5)	19(5)	25(7)	-3(4)	1(4)	5(4)
C(15)	36(6)	26(6)	24(6)	3(5)	1(5)	8(5)
C(16)	36(6)	30(7)	30(6)	2(5)	-2(5)	-3(5)
Si	24(1)	37(2)	51(2)	-10(2)	-3(2)	-2(2)
C(17)	30(5)	53(10)	101(12)	-8(9)	1(6)	-11(5)
C(18)	29(5)	65(9)	54(8)	-10(7)	-4(6)	8(6)
C(19)	46(6)	76(9)	49(8)	-18(7)	-7(7)	-18(7)
P	35(1)	21(1)	27(2)	-2(1)	-3(1)	-2(1)
C(20)	45(6)	38(7)	66(10)	-5(7)	1(7)	-8(5)
C(21)	60(7)	22(6)	38(7)	-7(6)	-8(6)	-10(5)
C(22)	40(5)	31(6)	43(7)	14(7)	-4(6)	-10(4)

Table 6. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 3.

	x	y	z	U(eq)
H(6a)	4020	3580	5710	44
H(6b)	3290	3230	4950	44
H(6c)	4360	3810	4780	44
H(7a)	1380	3950	6370	45
H(7b)	490	4280	5720	45
H(7c)	1310	3460	5480	45
H(8a)	780	6300	6430	49
H(8b)	620	6890	5600	49
H(8c)	140	5840	5680	49
H(9a)	3180	7480	6050	43
H(9b)	3530	7630	5110	43
H(9c)	2310	7740	5370	43
H(10a)	5180	5840	5450	48
H(10b)	5070	5340	4570	48
H(10c)	4840	6450	4660	48
H(11)	1650	5760	2020	33
H(12)	3220	6780	2560	29
H(13)	2640	7630	3910	32
H(14)	680	7230	4230	31
H(17a)	-4000	4080	2790	74
H(17b)	-2780	3760	2840	74
H(17c)	-3290	4410	3560	74
H(18a)	-4600	6200	2400	59
H(18b)	-3900	6550	3160	59
H(18c)	-3680	6970	2260	59
H(19a)	-3500	4940	1000	68
H(19b)	-2580	5710	910	68
H(19c)	-2280	4630	1100	68
H(20a)	1040	2300	3590	60
H(20b)	2200	2750	3450	60
H(20c)	1670	2770	4350	60
H(21a)	270	3330	2240	48
H(21b)	390	4460	2150	48
H(21c)	1420	3790	2100	48
H(22a)	-780	3200	3650	46
H(22b)	-480	3740	4490	46
H(22c)	-940	4320	3720	46